Estructura de la Materia 2 - Verano de 2026

Guía 1: Redes Cristalinas y Espacio Recíproco

1. Escriba un **conjunto de vectores primitivos** para cada una de las siguientes redes de Bravais:
   a) Cúbica simple (SC, *simple cubic*).
   b) Cúbica centrada en el cuerpo (BCC, *body-centered cubic*).
   c) Cúbica centrada en las caras (FCC, *face-centered cubic*).
   d) Triangular 2D (red hexagonal 2D).
   e) Hexagonal simple (red hexagonal 3D).

2. Describa las siguientes estructuras en términos de una **red de Bravais con base**. Para cada caso, indique los **vectores primitivos** y las **posiciones** de la base:
   a) BCC como red SC con base.
   b) FCC como red SC con base.
   c) Red diamante.
   d) NaCl (cloruro de sodio)
   e) CsCl (cloruro de cesio).
   f) ZnS (blenda de zinc).

3. Determine si cada estructura es una **red de Bravais** pura:
   - Si lo es: dé un conjunto de **vectores primitivos**.
   - Si no: descríbala como **red de Bravais + base mínima** (indicando posiciones).

   Partiendo de una celda **SC**:
   a) SC + puntos en el centro de las **dos caras** paralelas a xy (superior e inferior).
   b) SC + puntos en el centro de las **cuatro caras laterales** (paralelas a xz y yz).
   c) SC + puntos en el centro de las **12 aristas** de la celda.

4. Encuentre **dos conjuntos diferentes** de vectores primitivos para las redes **BCC** y **FCC**. Para **cada** conjunto, calcule el **volumen de la celda primitiva** que generan,

$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|.$$

5. Para las redes **SC**, **BCC** y **FCC**, identifique los **primeros, segundos y terceros vecinos** de un sitio dado, indicando para cada conjunto:
   - **cantidad** de vecinos,

- **posiciones relativas** (respecto del sitio elegido),
- **distancia** al vecino en función del parámetro de red a.

6. Calcule la **fracción de empaquetamiento** (volumen ocupado por los átomos dividido por el volumen total de la celda) para las redes **SC**, **BCC**, **FCC** y **diamante**. Utilice la aproximación de **esferas rígidas**: los átomos se modelan como esferas de radio r, centradas en los puntos de la red, que **se tocan sin superponerse**.

7. **(Opcional)** Considere una estructura HCP con parámetro de red basal a (en el plano hexagonal) y parámetro c (altura de la celda convencional). En la aproximación de **esferas rígidas**, demuestre que para una HCP "ideal" se cumple
$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}.$$
   - Compare este cociente con valores experimentales para materiales reales (por ej. tabla 4.4 de Ashcroft–Mermin).
   - Identifique **primeros, segundos y terceros vecinos** en HCP (cantidad, posiciones relativas y distancias).
   - Compare con una red **FCC** y discuta **similitudes y diferencias** en la geometría local: estructura por capas, tipo de apilamiento y degeneraciones de distancias entre vecinos.

8. Muestre que una red **tetragonal centrada en el cuerpo** (BCT, *body-centered tetragonal*) puede describirse, mediante una elección adecuada de celda (o de vectores primitivos), como una red **tetragonal centrada en las caras** (FCT, *face-centered tetragonal*). Explique por qué una equivalencia análoga **no** existe entre las redes **BCC** y **FCC**.

9. Determine los **vectores primitivos de la red recíproca** para las redes **SC**, **BCC**, **FCC**, **hexagonal 2D** y **hexagonal 3D**. Puede utilizar la fórmula
$$\mathbf{b}_i = 2\pi \, \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)}, \qquad (i,j,k) \text{ cíclicos},$$
tal que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \, \delta_{ij}$. En el caso 2D, trabaje en el plano $k_x k_y$ (puede tomar un $\mathbf{a}_3 \parallel \hat{\mathbf{z}}$ auxiliar).

10. Demuestre que la **red recíproca de la red recíproca** coincide (salvo una convención de factores 2π) con la **red directa**. Además, verifique que la red recíproca de **BCC** es **FCC** y que la de **FCC** es **BCC**. Finalmente, indique cuáles **redes de Bravais** son **autorrecíprocas**.

11. Para una red cuadrada bidimensional, dibuje la **primera, segunda y tercera zona de Brillouin**. Calcule el **área** ("volumen" en 2D) de cada zona en el espacio recíproco.

12. Considere una red hexagonal 3D con vectores primitivos
$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} a \, \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} a \, \hat{\mathbf{y}}, \qquad \mathbf{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} a \, \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} a \, \hat{\mathbf{y}}, \qquad \mathbf{a}_3 = c \, \hat{\mathbf{z}}.$$

a) Calcule el volumen de la celda primitiva.

b) Determine los vectores primitivos de la red recíproca $\mathbf{b}_i$.

c) Describa y dibuje la primera zona de Brillouin.

13. Represente una red **FCC** como una red **SC** de parámetro a con una **base de cuatro puntos**.

    a) Determine el **factor de estructura** y muestre que sólo toma valores 0 o 4 en los puntos de la **red recíproca** de la SC (considere $f_s = 1$).

    b) Muestre que, al eliminar los puntos para los cuales el factor de estructura se anula, el conjunto restante forma una red **BCC** con parámetro $4\pi/a$. Explique por qué este resultado es esperable.

    Recordatorio: para una base con átomos en $\{\mathbf{d}_s\}$ y factores de forma $\{f_s\}$,

$$S_{hkl} = \sum_s f_s \, e^{i\mathbf{K}_{hkl}\cdot\mathbf{d}_s}, \qquad I_{hkl} \propto |S_{hkl}|^2.$$

14. Para las redes **SC**, **FCC** y **BCC**, usando la **celda cúbica convencional** de parámetro a, dibuje los planos con índices de Miller (100), (110) y (111), o un múltiplo entero de ellos si hay extinciones. Asimismo, calcule el el **espaciamiento interplanar**

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}_{hkl}|}, \qquad \mathbf{K}_{hkl} = h\,\mathbf{b}_1 + k\,\mathbf{b}_2 + l\,\mathbf{b}_3.$$

15. Considere una red ortorrómbica con celda convencional de parámetros $a \neq b \neq c$ y **ángulos rectos** ($\alpha = \beta = \gamma = 90°$). Calcule el **espaciamiento interplanar** de la familia $\{112\}$ para $a = 2\,\text{Å}$, $b = 3\,\text{Å}$ y $c = 4\,\text{Å}$.

16. Para una red **FCC**, considere los planos con índices de Miller (100) y (001) definidos respecto del conjunto de vectores primitivos

$$\mathbf{a}'_i = \frac{a}{2}\left(\hat{\mathbf{e}}_j + \hat{\mathbf{e}}_k\right), \qquad (i, j, k) \text{ cíclicos.}$$

    Calcule los **índices de Miller** de esos mismos planos respecto del conjunto

$$\mathbf{a}_1 = a\,\hat{\mathbf{x}}, \qquad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}\right), \qquad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}\right).$$

17. Se estudian **tres muestras policristalinas (polvo)** mediante difracción de rayos X en geometría de **Debye–Scherrer**. Se sabe que una muestra corresponde a una red **FCC**, otra a una red **BCC** y la tercera a la estructura **diamante**. Las posiciones aproximadas de los **primeros cuatro anillos** se reportan como el ángulo $\phi = 2\theta$ (Tabla 1).

    En un experimento de polvo se considera el **primer orden** de Bragg ($n = 1$), de modo que la condición de difracción puede escribirse como

$$2\,d_{hkl}\,\sin\theta = \lambda, \qquad (\theta = \phi/2).$$

Aquí d_{hkl} es el espaciamiento interplanar asociado a la familia de planos (hkl), λ es la longitud de onda, y θ es el ángulo de Bragg.

a) A partir de las posiciones relativas de los anillos, identifique qué muestra (**A**, **B** o **C**) corresponde a **FCC**, cuál a **BCC** y cuál a **diamante**. (Sugerencia: compare las razones entre $\sin^2\theta$ de los primeros picos y use reglas de extinción sistemática).

b) Para $\lambda = 1{,}5$ Å, determine el **parámetro de red** a de cada muestra.

Muestra A	**Muestra B**	**Muestra C**
42,2°	28,8°	42,8°
49,7°	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°

Tabla 1: Posiciones de los primeros cuatro anillos: ángulo $\phi = 2\theta$.

18. **(Opcional)** Considere una red **BCC** como una red **SC** de parámetro $a = 4$ Å con una base.

a) Determine las **condiciones de extinción** (reflexiones prohibidas) para la difracción.

b) En un experimento de **Debye–Scherrer**, se incide con rayos X de longitud de onda $\lambda = 2{,}5$ Å. Calcule los **tres primeros ángulos** ϕ (con $\phi = 2\theta$) para los cuales se esperan máximos de intensidad.

c) En un experimento de **Laue**, se incide con un haz paralelo al eje $\hat{\mathbf{z}}$ y con longitudes de onda en el rango $2{,}5\,\text{Å} < \lambda < 3\,\text{Å}$. Indique **qué patrón cualitativo** espera observar (qué familias de planos/reflexiones pueden aparecer y cuáles estarán ausentes por extinción).

19. **(Opcional)** Considere un cristal bidimensional cuya red de Bravais es **rectangular centrada**, con celda convencional de lados $a = 10$ Å y $b = 5$ Å, y una base de **dos átomos** ubicada en las posiciones $(0, 0)$ y $(a/2, b/2)$.

a) En un experimento de **polvo** con rayos X de longitud de onda $\lambda = 2$ Å, determine el ángulo de Bragg θ correspondiente a las **tres reflexiones permitidas** de **menor** índice de Miller (h, k) (sin contar equivalentes por simetría).

b) Determine si existen **ausencias sistemáticas**. Indique la condición sobre (h, k) y explíquela a partir del **factor de estructura**.

c) Estime la **intensidad relativa** de las líneas observadas si la base estuviera formada por **C** $(Z = 6)$ y **O** $(Z = 8)$ (en lugar de átomos idénticos) y el **factor de forma atómico** f se aproxima como $f \simeq Z$.